



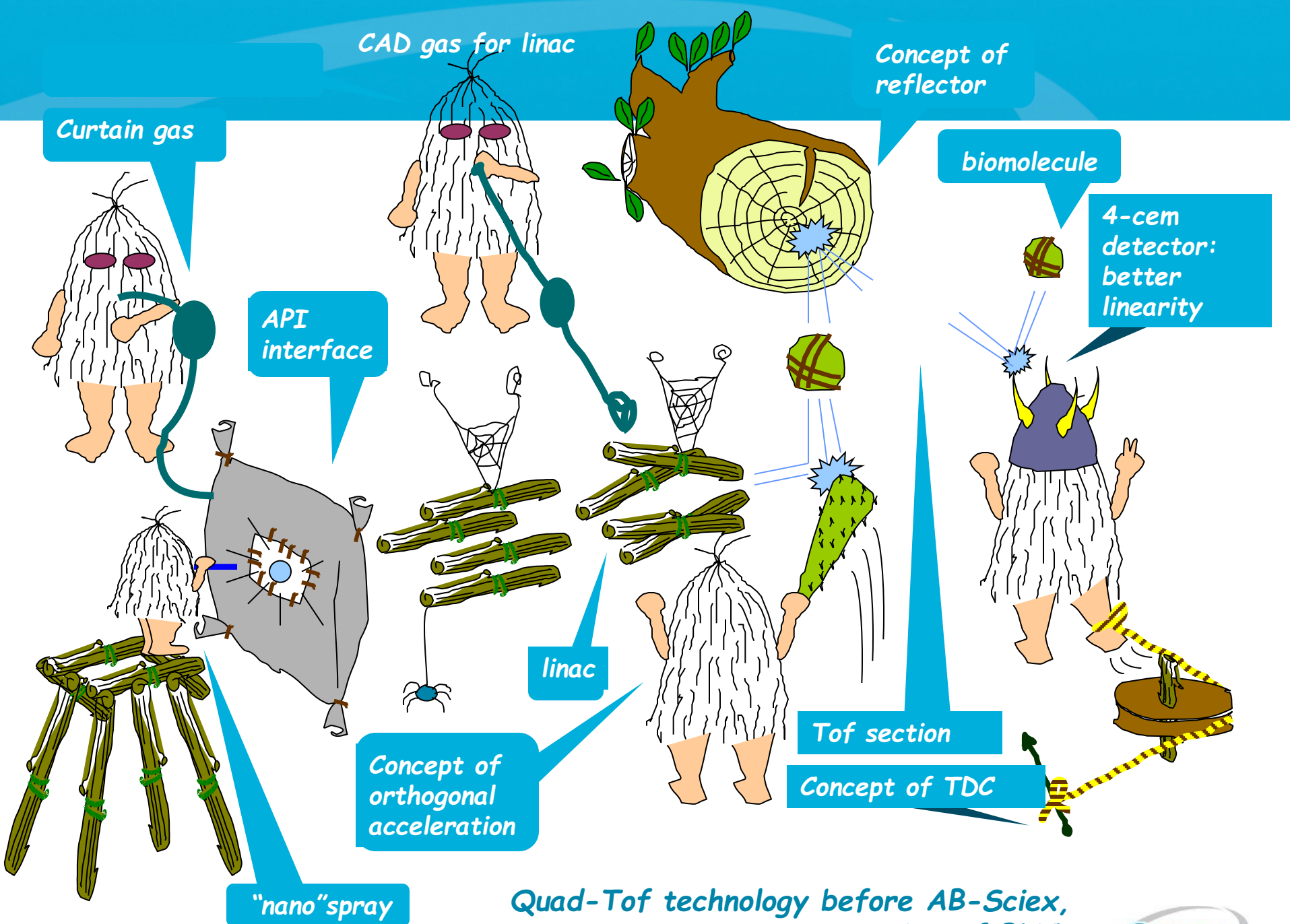
Sciex X500R készülék bemutatása a SWATH alkalmazásai tükrében

Szabó Pál,
MTA TTK

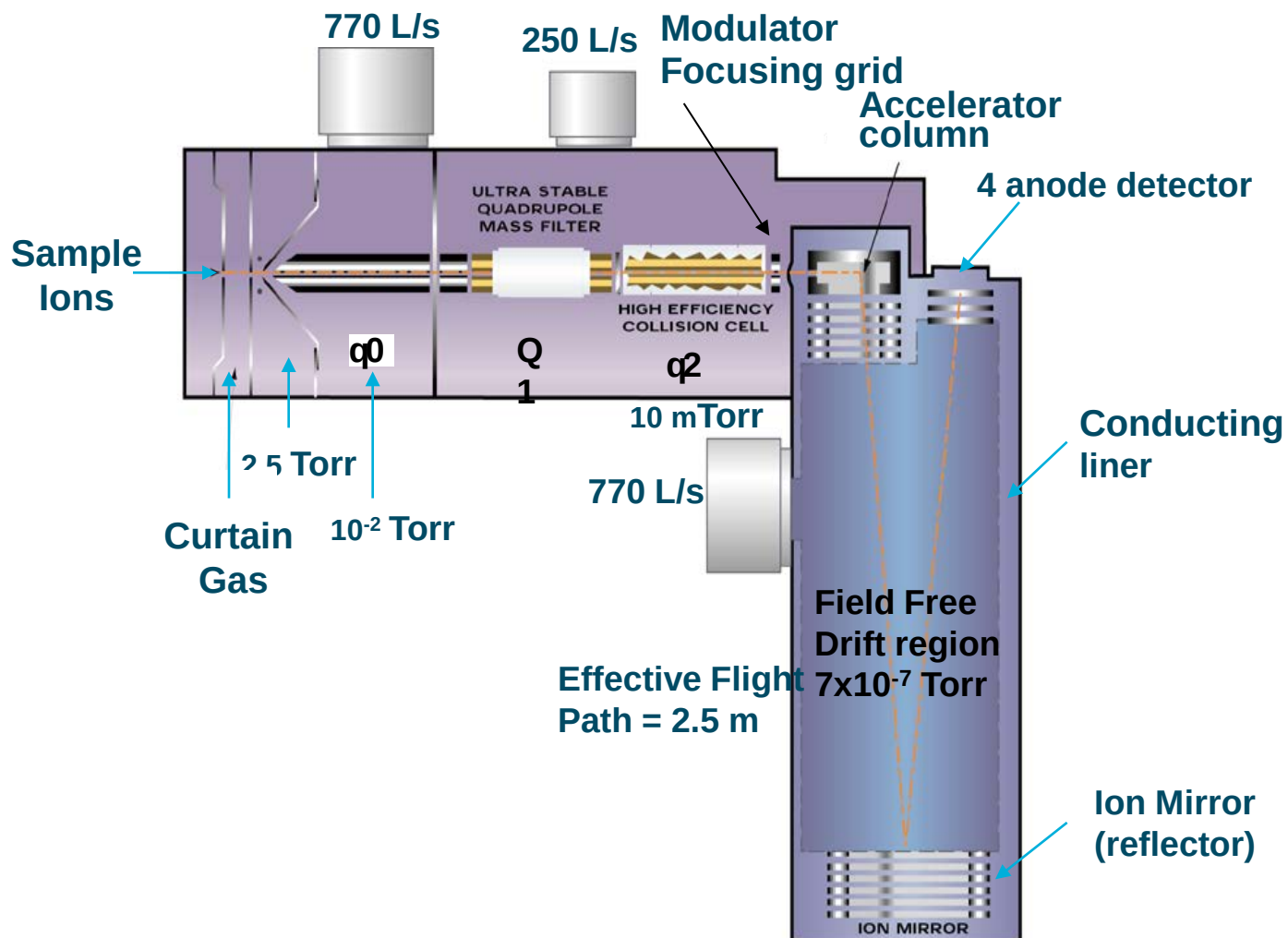
Hagyományos QTOF rendszer

- Aggályok:
 - Termetes
 - Bonyolultnak tűnő
 - Nem rutin feladatokra való
- Következmény: Nem merjük megvenni





Q-TOF készülék (QSTAR)



- Nagy érzékenység
- Nagy felbontás (>10.000)
- Nagy felbontás fragmensek esetében is
- Nagy tömegpontosság ($<5\text{ppm}$)
- Relatív nagy tömegtartomány ($6000\text{-}8000\text{ Q}$, $\cong 40.000\text{ TOF}$)
- Hagyományos tandem scanfunkciók

Van más helyette?

SCIEX X500R QTOF System powered by SCIEX OS software



SCIEX X500R QTOF System

SCIEX ExionLC™ AC System

SCIEX OS software

Mi is ez a csodabogár?

- Hardware
 - SCIEX ExionLC™ rendszer
 - SCIEX OS software által vezérelhető
 - Megbízható kapcsolat az LC és az MS között
 - SCIEX X500R QTOF rendszer
 - N-alakú ionoptika
 - Fűtött TOF cső
 - Egyszerű asztali kivitel
- Software
 - SCIEX OS software
 - Teljesen új felhasználói felület
 - Azonosítás és kvantitálás egy lépésben
 - Automatikus ismeretlen azonosítás

Mitől olyan jó ez?

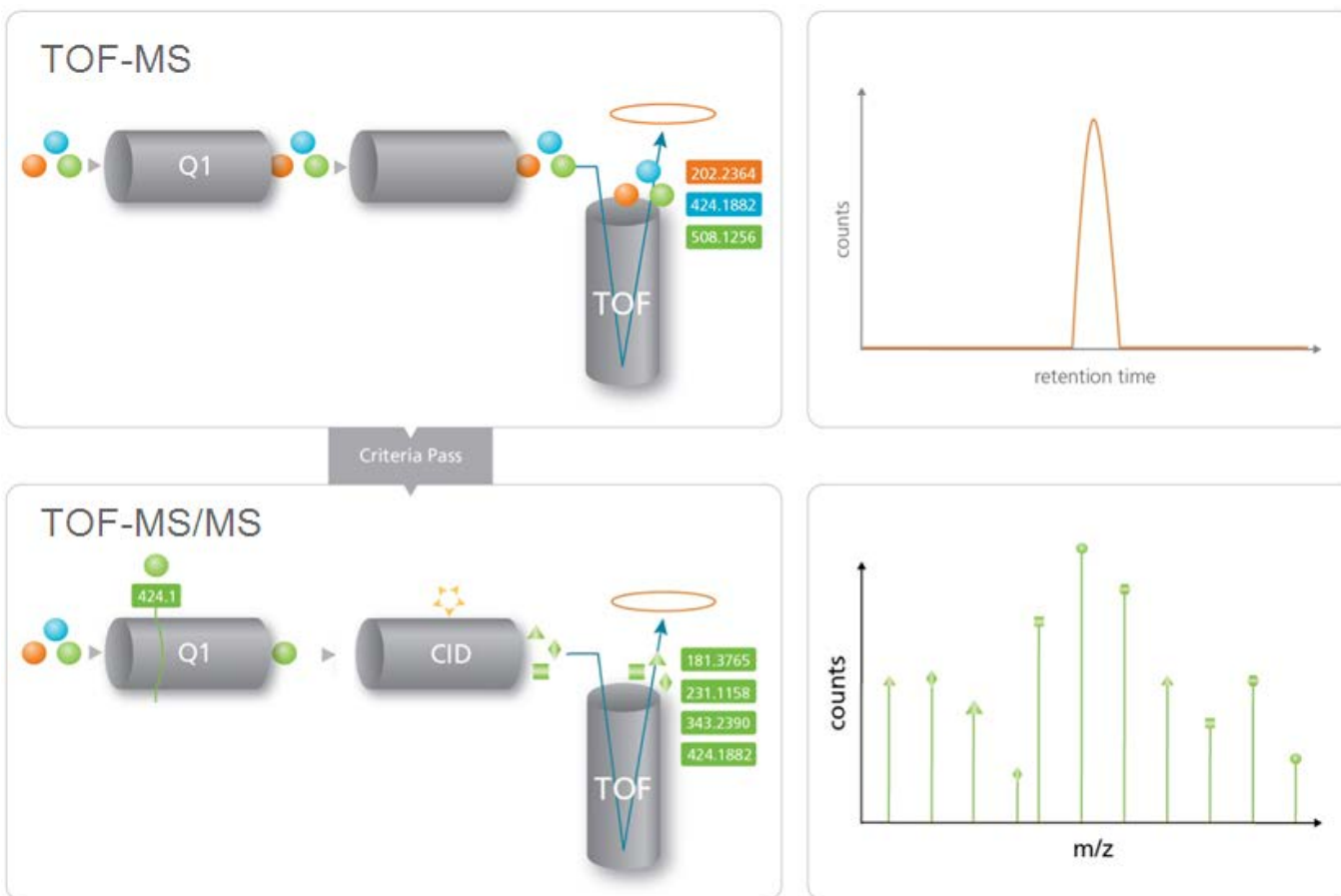
SCIEX X500R QTOF Rendszer

- Az első nagy felbontású, nagy érzékenyséű MS/MS rendszer, melyet **RUTIN** használatra terveztek
 - Érzékenység: könnyen elérhető MRL értékek
 - Felbontás: növeli a szelektivitást bonyolult mátrix esetén
 - Lineáris tartomány: 4 nagyságrend
 - Tömegpontosság: szerkezetazonosításnál elengedhetetlen
 - MS/MS alapú azonosítási lehetőségek: IDA, SWATH™ MS/MS^{ALL}, ionarányok és MS/MS spectrumok
 - Robusztusság köszönhető: Turbo V™ forrás illetve Curtain Gas™ interface

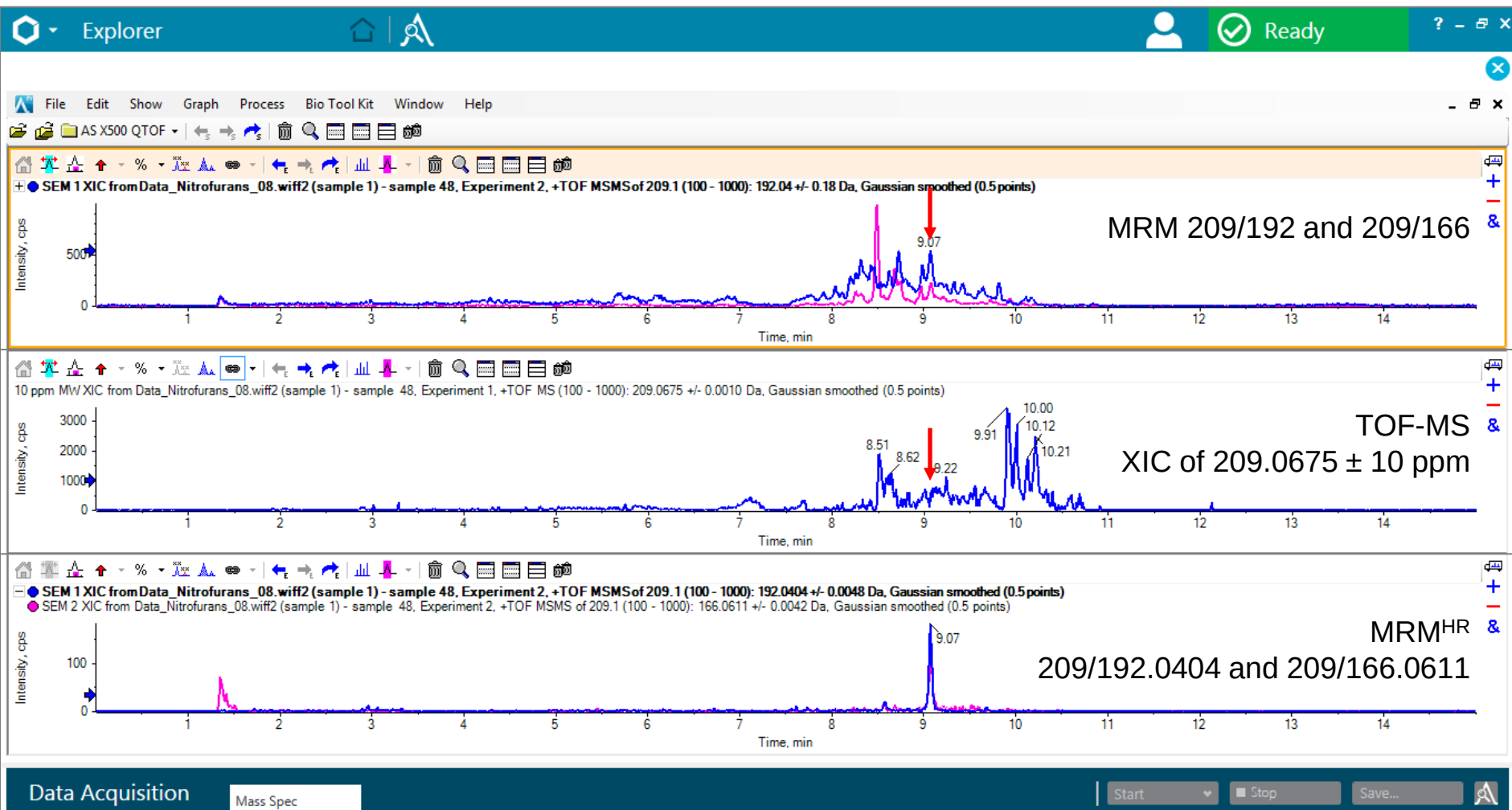
- Célmolekulák keresése (targeted screening)
 - TOF MS^{HR}
 - TOF MSMS (MRM)
 - MRM^{HR}
- Ismeretlen komponensek keresése (non targeted screening)
 - TOF MS (ChemSpider)
 - TOF MSMS
 - SWATH

Információfüggő MS/MS (IDA)

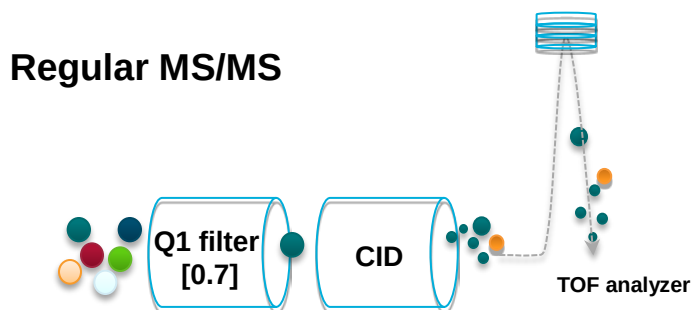
A Q1 egységnyi felbontásának köszönhetően nagy szelektivitású MS/MS spektrumokat szolgáltat



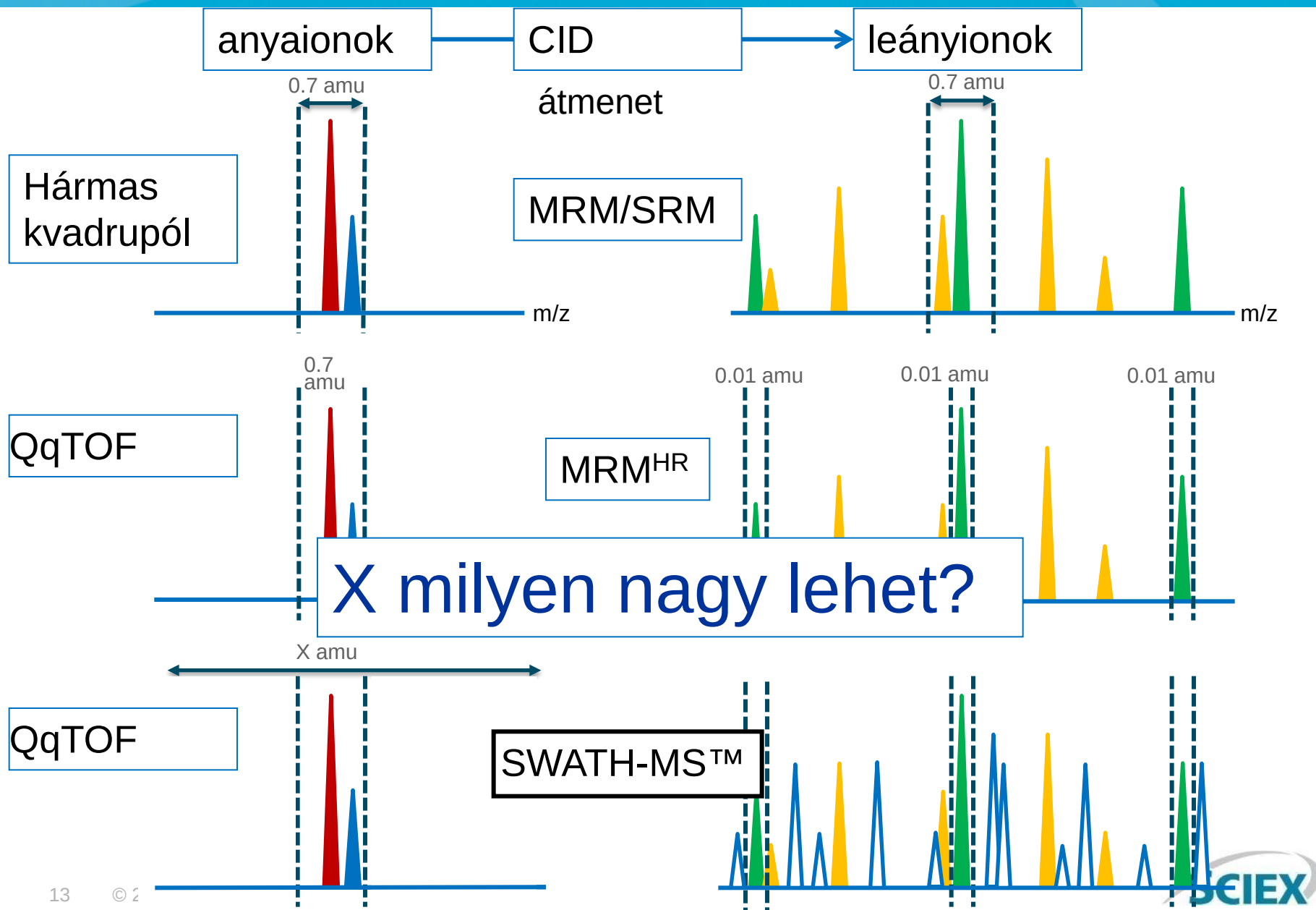
Megnövelt szelektivitás



- „**S**equential **W**indowed **A**cquisition of all **T**heoretical mass spectra” lehetővé teszi MS/MS felvételek készítését általános és átfogó módon
 - A Q1 kvadrupólt szélesre nyitjuk és léptetjük a teljes tömegtartományban
 - Data Independent Acquisition (DIA), információtól **független** mérés
 - MS/MSALL

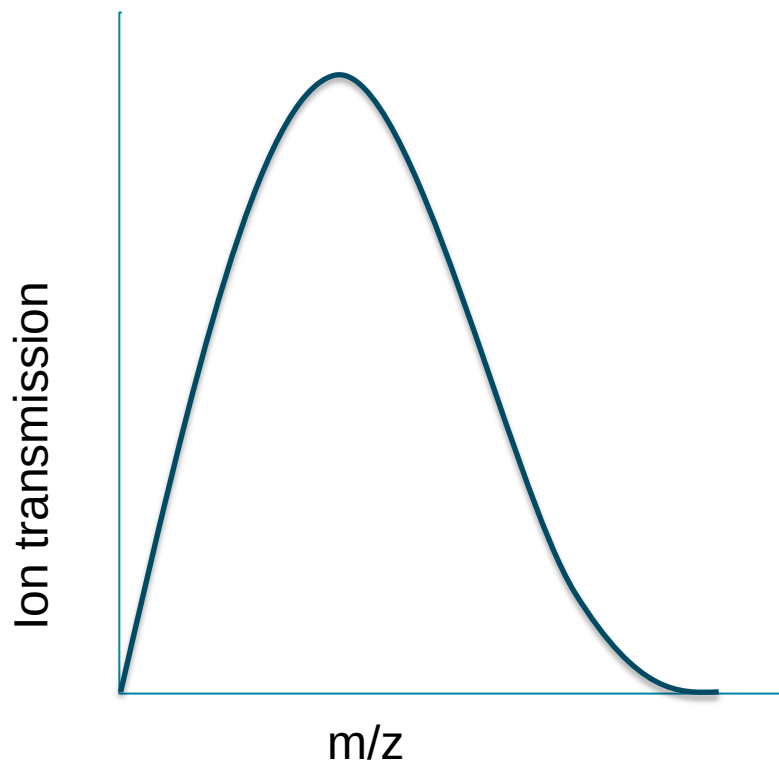


MS/MS kvantitatív mérési módszerek

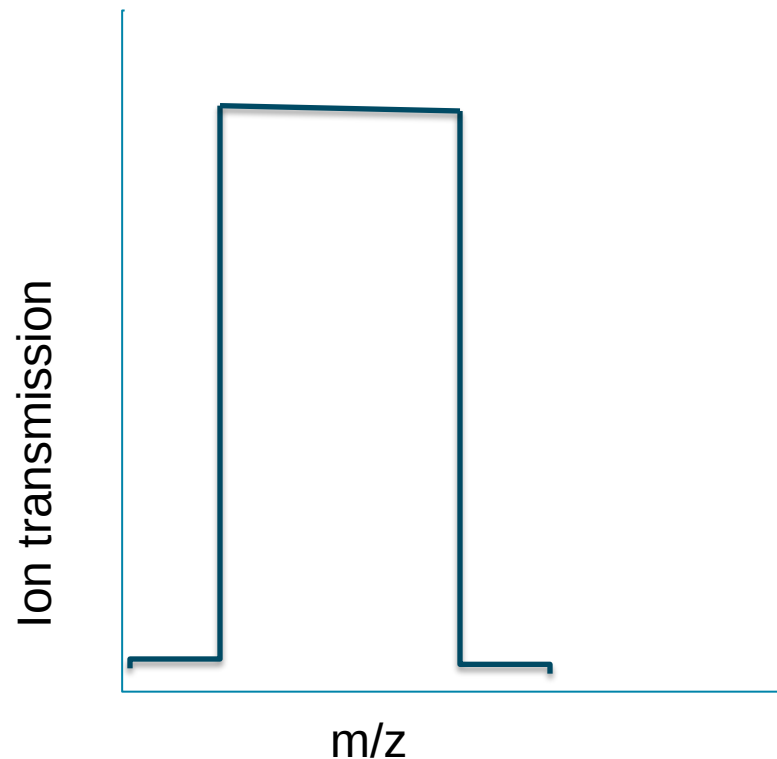


Szükséges készülék paraméterek

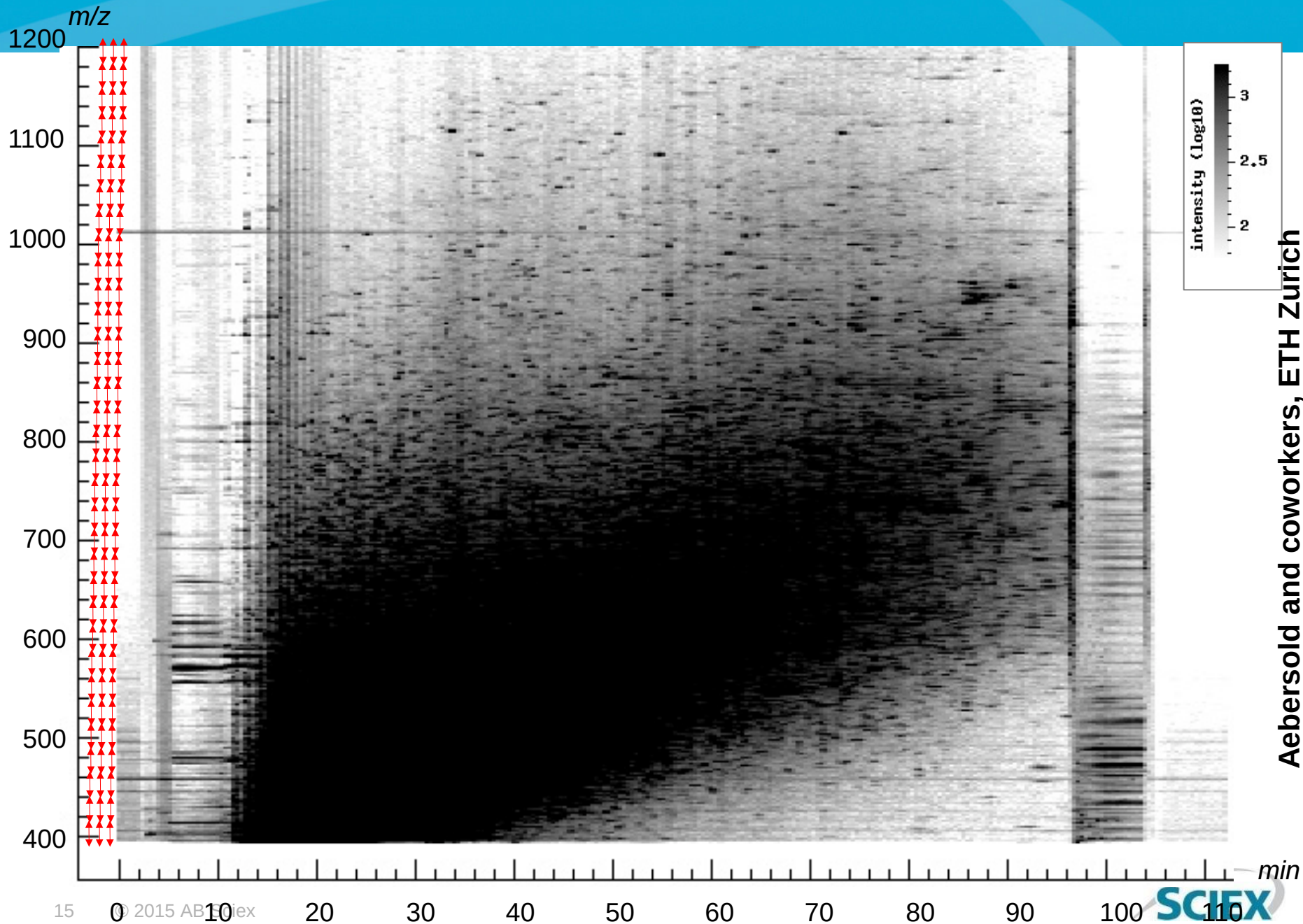
Normal transmission



Transmission in case SWATH

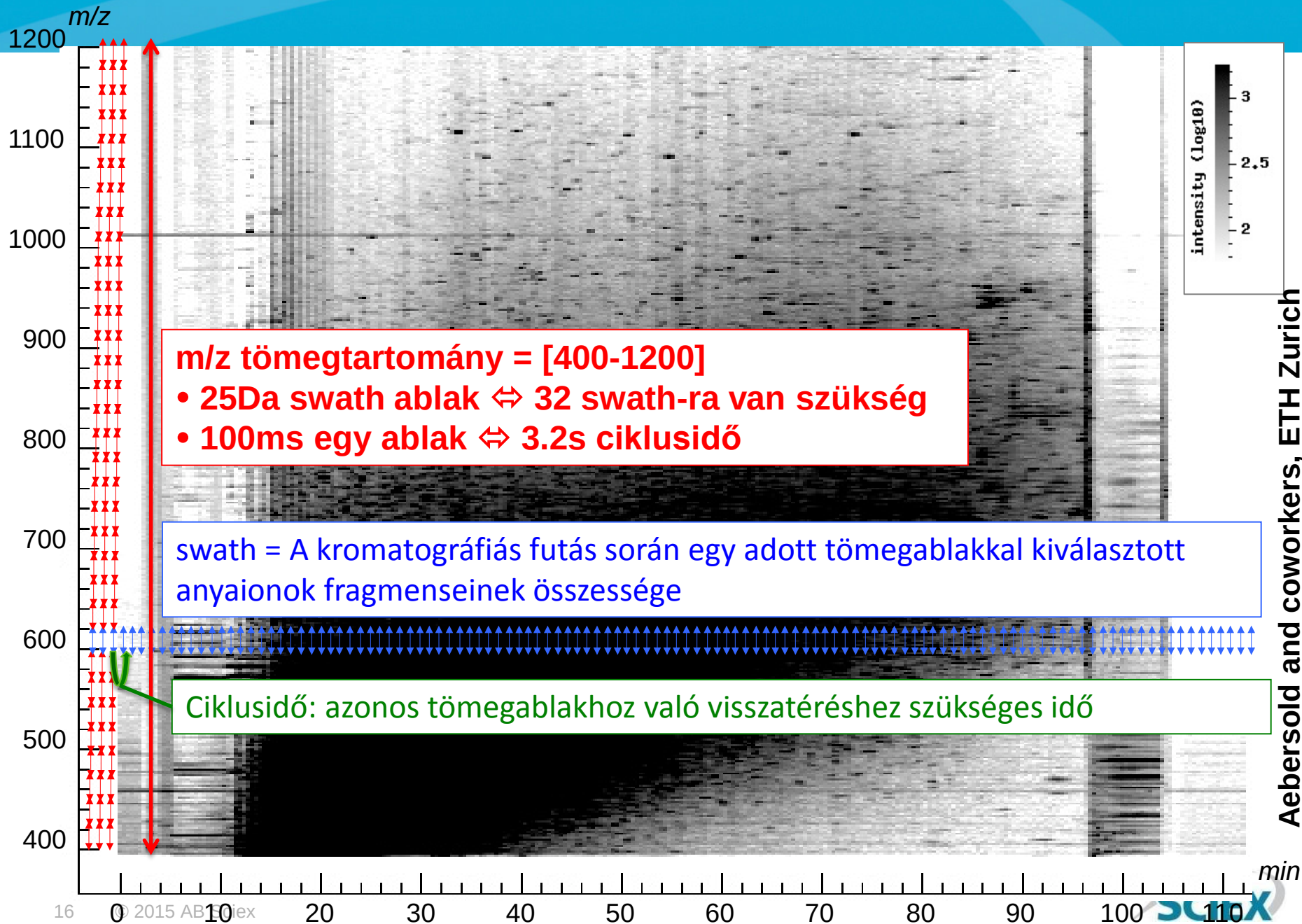


SWATH-MS Adatgyűjtés elmélete

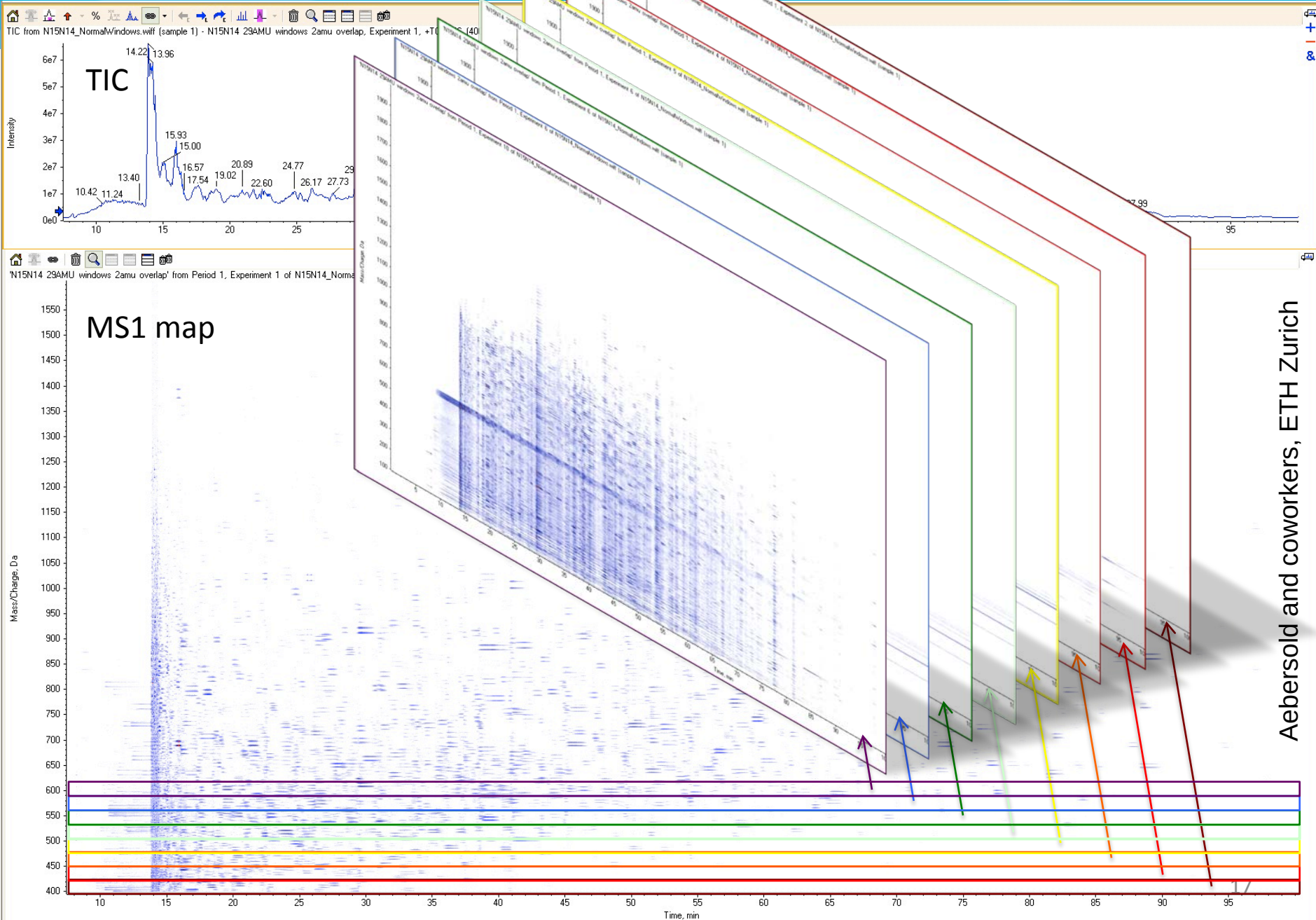


Aebersold and coworkers, ETH Zurich

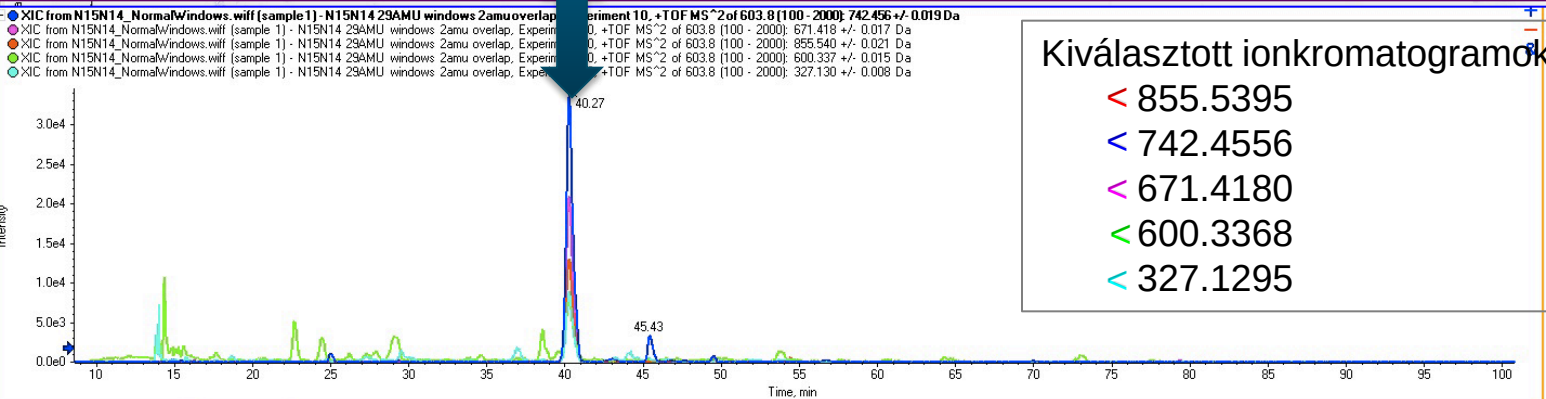
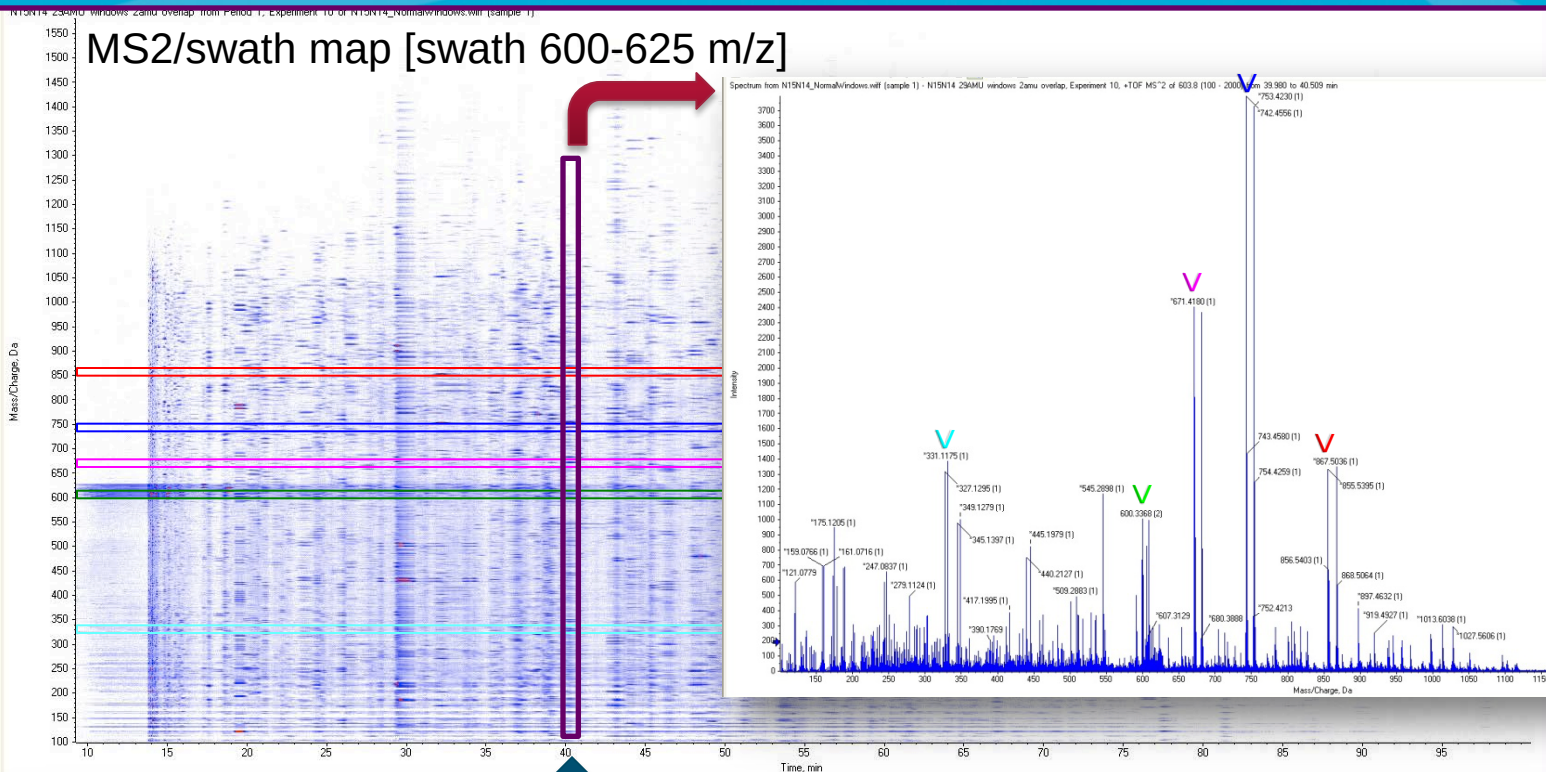
SWATH-MS Adatgyűjtés elmélete



SWATH-MS adatgyűjtés elmélete: adatszűrés és értékelés



SWATH-MS adatgyűjtés elmélete: Adatgyűjtés és értékelés



Kiválasztott ionkromatogramok:

< 855.5395

< 742.4556

< 671.4180

< 600.3368

< 327.1295

SWATH előnyei

- általános és nem célzott
- nincs módszerfejlesztés!
- Az adatok utólagosan visszanyerhetők (mind MS, MS/MS és XIC)
- A mérési idő nem növekszik a mérendő komponensek számával
- A szelektivitása hasonló MRM^{HR} -hez (a háttér általában magasabb)



Answers for Science.
Knowledge for Life.™



SCIEX X500R: Egyszerűen, Nagyszerű!